



TITLE:

モンテカルロ法のアヴァンギャルド : あるもののシミュレーションから  
ないもののシミュレーションへ  
(基研研究会「統計物理の展望」, 研究会報告)

AUTHOR(S):

菊池, 誠

---

CITATION:

菊池, 誠. モンテカルロ法のアヴァンギャルド : あるもののシミュレーションから  
ないもののシミュレーションへ(基研研究会「統計物理の展望」, 研究会報告). 物性研究 1999,  
71(4): 608-617

ISSUE DATE:

1999-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96547>

RIGHT:

## モンテカルロ法のアヴァンギャルド

— あるもののシミュレーションからないもののシミュレーションへ —

菊池誠 (大阪大学大学院理学研究科物理学専攻)

### 1 はじめに

この講演では、古典スピン系を中心として、モンテカルロシミュレーションの方法論の動向をレビューした<sup>1</sup>。対象としては、教科書に載っている程度のモンテカルロ法は知っているが、マルチカノニカルと言われてもなんのことかわからないくらいの人を想定したので、現にモンテカルロ法を主要な武器として研究を行なっているかたには退屈と思うが、研究会の趣旨からしてご理解いただきたい。

### 2 概論編 (なぜ方法を考えるのか)

まずは、統計力学に使われるいわゆるモンテカルロ法 (動的モンテカルロ法) の原理を復習しておこう。もう少し詳しいことについては、文献を参照していただきたい [1]。

イジングハミルトニアンを例にとる。

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (S_i = \pm 1)$$

$t$  ステップでの状態分布関数  $P(\{S\}, t)$  に対し、マルコフ過程

$$P(\{S\}, t+1) = \sum_{\{S'\}} w_{SS'} P(\{S\}, t)$$

を定義する。遷移確率に詳細釣り合いの条件

$$\frac{w_{SS'}}{w_{S'S}} = e^{-\beta \Delta E_{SS'}} \\ (\Delta E_{SS'} \equiv E(\{S'\}) - E(\{S\}))$$

を課せば、この過程の定常分布が熱平衡のギブス分布

$$P_{eq}(\{S\}) \propto e^{-\beta E(\{S\})}$$

<sup>1</sup>ここでは、熱平衡状態での物理量の平均値を求めるための技法としてのモンテカルロシミュレーションに話を限った。ダイナミクスについてはまた別の議論が必要である

に一致する。この条件を満たす遷移確率としては

メトロポリス法

$$w_{SS'} = \min[1, e^{-\beta \Delta E_{SS'}}]$$

熱浴法

$$w_{SS'} = \frac{e^{-\beta E(\{S\})}}{e^{-\beta E(\{S\})} + e^{-\beta E(\{S'\})}}$$

などが使われる。イジングモデルに対する single-spin flip 型モンテカルロシミュレーションの手順は以下ようになる

1. 反転するスピンを選び、反転前後のエネルギー差  $\Delta E$  を計算
2.  $[0, 1)$  の一様乱数を発生
3. 乱数  $\leq w(\Delta E)$  ならスピンを反転。条件がなりたたなければなにもしない
4. 最初に戻って繰り返す

さて、single-spin flip のシミュレーションというのは極めて一般的な方法で、プログラムを書いて実行するだけなら、イジングモデルに限らずどんなスピン系にでもすぐさま使える。しかし、計算を実行できるからといって、意味のある計算ができるとは限らない。単に single-spin flip を実行しただけでうまくいくかどうかは、もちろん、問題ごとに検討しなくてはならない。なかでも、物理的に面白い問題を扱おうとすると往々にして”遅い緩和”という問題にぶつかる。そういう問題の例としては、たとえば

- 臨界現象 (critical slowing down)

この場合、システムサイズ  $L$  に対して緩和時間が  $\tau \sim L^2$  と伸び、普通のスピン系で  $z$  の値は 2 程度。

- 一次転移 (Hysteresis)  
準安定状態への凍結が起こると、そこからの脱出時間はシステムサイズに対して指数的に長くなる。
- ランダム系 (Rugged free-energy landscape)  
多くの準安定状態をもち、極端に遅いダイナミクスが観測される。スピン系に限らず、複雑液体などでも遅いダイナミクスが問題になる。

などがあげられる。

このような遅い緩和に対処するために、さまざまな方法が提案されてきた。特に最近、方法の発展が著しい。そのなかから、本講演では、ある程度一般性がある、しかも方法自体が物理的に面白いものをいくつか取り上げて議論した。

あらためて強調しておきたいのは、single-spin flip が万能ではないのと同様、他のどんな方法も決して万能ではありえないということである。上で挙げた三つの例は、どれも遅い緩和という共通点はあるものの、その原因はそれぞれに違う。当然、すべてを同じ方法でうまく扱えるなどと期待するべきではないし、実際そういうわけにはいかない。むしろ、single-spin flip のようにひとつの方法にとらわれるのではなく、問題の性質に応じてシミュレーションの方法も選択すべきである。その際、熱平衡量の計算が目的なのだから、その目的が達せられる限り、計算自体がどれほど非物理的な過程に基づいていようといいいかないか、あるいは非物理的な状態や過程を積極的に使おうというのが、最近の傾向であり、またこの講演の主なメッセージである。

なお、

- マルチスピンコーディング (for Ising and Potts)
- ベクトル化 (for Short-ranged interaction model)

などは確かに一般性のある話題だが [2]、これらは、むしろ single spin flip をどう implement するか、という問題なので今回はとりあげなかった。

むしろ、これらの方法が実用上の重要性を失ったという意味ではない。

### 3 等価な別のモデルでのシミュレーション

実際にシミュレーションしたいモデルそのままではなく、元のモデルと等価な別のモデルを考えるとというのは、当然ありうる。必要な結果さえ得られるなら、元のモデルに忠実である必要はない。ただし、等価なモデルなど無数に作れてしまうのだけど、やみくもに作ればいいというわけではない。極端な話、イジングモデル ( $S = \pm 1$ ) を格子ガス ( $S = 0, 1$ ) に直したところで、なんら本質的な解決にはならないことは自明である。あくまでも、モデルの変換が数値計算上の利点を持っているなければならない。

その意味で、一般的な処方として歴史的に重要なものの例としては、Trotter 公式に基づく鈴木 の量子 MC があげられよう。これは、 $d$  次元量子系を  $(d+1)$  次元古典系に変換したことによって、非可換性を (見掛け上) 解消したものであり、モデルを変換することに積極的な意味がある好例かと思う (むしろ、Trotter 方向を有限とした系では完全に等価ではないが)。

#### 3.1 Swendsen-Wang

Potts モデルに対する Swendsen-Wang 法 [3] もまた、そのような方法のひとつである。この方法では、元の Potts モデルを Fortuin & Kasteleyn 流のパーコレーション表示 [4] に焼き直す。では、そのココロはなんだろうか。まず、ターゲットは臨界点の critical slowing down である。critical slowing down の原因は、むしろ臨界点で相関距離が発散することに帰せられる。長距離相関があるのに single-spin flip 法をやっていたのでは、統計的に独立なスピン配置を得るのに時間がかかるのは当然だろう。そこで、スピンを一個一個反転するのではなく、スピンの大きな塊を一挙にひっくり返せばよさそう。しかし、やってみればわ

かるのだけど、大きなスピン・クラスターをやみくもにひっくり返そうとしても、エネルギー差が大きすぎて容易には受けつけられない。やみくもにやるのではなく、なにか意味のあるクラスターを考える必要がある。

そこでパーコレーション表示である。まず、単純なボンドパーコレーションのボンド配置をモンテカルロ法で生成することを思いだしてみよう。この場合、各ボンド配置はそれ以前に生成されたものと全く無関係に一から作られるので、すべてのボンド配置は統計的に独立である。つまり、当たり前のことだが、パーコレーションのシミュレーションでは臨界点直上であっても *critical slowing down* が生じない (!)。そこで、Potts モデルについても、パーコレーション表示に基づくシミュレーションなら、*critical slowing down* が緩和されるのではないかという期待ができる。

$q$  状態ポッツモデルの分配関数はパーコレーション表示で以下のように書ける。

$$Z = \sum_p p^b (1-p)^m q_c^N$$

$$p = 1 - e^{-\beta J}$$

最近接スピンペアが同じ状態のとき、そのペアをボンドでつなぐ確率が  $p$  である。つないだペアの数を  $b$ (bond)、同じ状態ではあるがつながなかったペアの数を  $m$ (missing bond) と書いてある。 $N_c$  はそのようにしてボンドでつなげることによってできたクラスターの総数である。つまり、この式は、“同じ状態を持つスピンを確率  $p$  でつなぎ、できあがった各クラスターに独立にスピン状態を割り当てなせ”と読むことができる。パーコレーション表示自体は古い話だが、そのように操作的に読みかえるならば、実はこの式自体がシミュレーションの方法を表していることになる。具体的な手順は以下の通り。

1. 適当なスピン配置からスタート
2. 同じスピン状態にあるペアの間を確率  $p$  で結ぶ。
3. 結ばれたスピンからなるクラスターそれぞれに対し、 $q$  通りの状態のうちいずれかをランダムに割り当てる。クラスター内のすべての

スピんに同じ状態が割り当てられる。

最後のステップは、個々のクラスターをあたかも一個のスピンであるかのように見做して、そのスピンをランダムに flip するのだと考えてもよい。つまり、スピんクラスターの定義として Fortuin & Kasteleyn のクラスター (FK クラスター) を使えば、クラスター全体を自由に反転できることになる。あるいは、最大限自由に動かせるクラスターが FK クラスターだと言ってもいい。

系の端から端までをつなぐ大きなクラスターが出現するのは、ちょうど臨界点のところだから、このシミュレーションでは臨界点でもっとも効率よくスピン・フリップができる。上で意味のあるクラスターと書いたのはそういう意味だ<sup>2</sup>。また、臨界点の磁氣的性質を決めるのは、この最大クラスターなので、これはまた物理的に意味のあるクラスターでもあることに注意。むろん、単純なパーコレーションと違い、スピン配置間の相関は完全にはなくならないが、*critical slowing down* を記述する指数  $z$  は二次元イジング模型で 0.35 程度以下、三次元イジング模型で 0.55 程度とされており、たしかに *critical slowing down* は大きく緩和されている<sup>3</sup>。なお、大きなクラスターが臨界点ではじめて出現するからこそ、この方法は有効なのであり、フラストレーションのある系などに単純に適用しようとしてもうまくいかない。パーコレーション表示を拡張してフラストレーションのある場合にも使えるようにしようという試みもなされている [6]。

### 3.2 Wolff

さて、いったんパーコレーション表示に気づいてしまえば、さらにそこからの variant も考えられる。Wolff 法 [7] は Swendsen & Wang 法を single-

<sup>2</sup>臨界点より低温側では、さらに大きなクラスターができるが、それを反転しても単に自発磁化の方向が逆になるだけで、あまり御利益はない

<sup>3</sup>ただし、この方法はベクトル計算機向きではないので、single-spin-flip の計算をベクトル計算機向けにチューニングしたものとは比べて、計算効率がいいかどうかは場合による。これに関しては伊藤たちによる研究がある [5]

cluster flipに変更したものである。つまり、いくつものクラスターを同時に成長させるのではなく、一点から成長させて成長が止まったところでそのクラスター全体を flip する。この方法は、平均的に Swendsen & Wang 法よりも大きなクラスターを flip させるので、critical slowing down はより緩和され、 $z$  はほぼ 0 と言われている。さらに Wolff はこの方法を Potts モデルだけではなく一般の連続スピン系にも使えるように拡張している。

### 3.3 Invaded cluster

毛色が変わったものとして Invaded cluster algorithm[8] についても触れておこう。上述の通り、パーコレーション (およびパーコレーション表示のポッツモデル) では、ちょうど臨界点で系の端から端までをつなぐクラスターが出現する。そこで、発想を逆転してみよう。ボンドをつなぐ確率を与えるのではなく、ランダムに選んだボンドをとにかくつないでゆき、系の端から端までつながったクラスターが出現したところで、つなぐのをやめてみる。こうして得られるボンド配置は (少なくとも熱力学極限で) 明らかに臨界点のボンド配置である。Swendsen & Wang 法をこの変異型パーコレーションで書き直したものが、Invaded cluster algorithm である<sup>4</sup>。

この方法には「温度」の概念があらわに含まれていない。シミュレーションを行えば、温度をパラメーターとせず臨界点が自動的に得られるというかなり奇妙なしろものである。したがって、いろいろな温度で物理量を計算して、その異常性から臨界点を決定するという普通のプロセスを踏まずに、臨界点での物理量が求められてしまう。

ただし、当然のことながら、この方法はカノニカルアンサンブルを生成しない。むしろ、熱力学極限ではカノニカルアンサンブルと一致するにしても、シミュレーションを行なうのは有限系なの

<sup>4</sup>この方法はもともと Invasion percolation から発想を得ているので、いきがかり上 Invaded cluster と呼ばれているが、研究会で田崎氏から指摘があったように、Invasion percolation を拡張したというよりは、もっとすなおに普通のパーコレーションの発想を逆転したものと思ったほうがよい

だから、アンサンブルが違うことは頭に入れておく必要がある。では、そのアンサンブルとはどういうものなのか、というと、これが実のところよく分かっていない。となれば、この方法を臨界点を効率よく計算するための単なる手法と見做すようでは、あまりにも発想が貧困ということにはなるまいか (そういう向きもあるようだが)。この方法が意味するものを掘り下げること、なにかしら新しい展望がひらけるかもしれない。少なくとも、そう考えてみるほうが建設的だろう。

## 4 アンサンブル概念の拡張

はじめに書いたように、モンテカルロ法でカノニカル分布が得られるのは、あくまでもマルコフ過程の定常分布がカノニカル分布と一致することを要請したからである。したがって、実は MC 法を使うとカノニカル・アンサンブルに限らず、任意のアンサンブルを構成できる<sup>5</sup>。実際、エネルギーの勝手な関数  $f(E)$  を用いて、平衡分布を

$$P_{eq}(\{S\}) \propto e^{-f(E(\{S\}))}$$

とするのはやさしい。そこで、もしカノニカルより便利なアンサンブルがあるなら、むしろ積極的にそれを使えばよいだろうという発想が生まれる。

ここでの話題とは発想が違うが、普通とは違うアンサンブルを構成する方法としては、

- 能勢の等温分子動力学
- Creuz のミクロカノニカル MC

あたりが歴史的にも重要だろう。どちらも余分の自由度 (demon) を導入することにより、普通のアンサンブル (分子動力学ならミクロカノニカル、MC ならカノニカル) から別のアンサンブルへの変更をなしとげているという共通点がある。

しかし、histogram reweighting が広く認知されて以降、アンサンブル選択の考え方は大きく変

<sup>5</sup>この点は、教科書的説明ではあまり強調されないが

わった<sup>6</sup>。シミュレーションはカノニカル以外の適当なアンサンブル (非物理的であっても構わない) で行なっても、得られた結果から histogram reweighting によってカノニカルアンサンブルを再構成すればいいからだ。histogram reweighting 自体は、注意して実行しないとバイアスなどの問題を引き起こしかねなかったのだが、拡張アンサンブルの登場によって、これが現代的な意義を得たといってもいいかと思う。むしろ、その目的からして、アンサンブルはカノニカルよりも広くとらなくてはならない。

#### 4.1 マルチカノニカル・アンサンブル

そのような方法の中でも、代表的なものが Berg et al. によるマルチカノニカル・アンサンブル [10] である。ひとことで言うなら状態の実現確率を状態密度  $\Omega(E)$  の逆数にするというものだ。あるいはエネルギーヒストグラムを平らにする、と言ってもよい。これは上述の関数  $f(E)$  として

$$f(E) = \log \Omega(E)$$

を選択したことに相当する。もちろん、 $\Omega(E)$  がはじめからわかっているなら問題は既に殆ど解けてしまっているわけで、あえてシミュレーションをする必要もなくなってしまう。ところが、Berg たちは“ $\Omega(E)$  を正確に知らなくても、ヒストグラムがだいたい平らでありさえすれば充分である”ということに気づいた。そこで、適当な温度 (充分高温) でカノニカルアンサンブルのシミュレーションを行なうことから始めて、preliminary run を

<sup>6</sup> 普通のカノニカル MC でエネルギーヒストグラムを得たなら、それに Boltzmann weight の逆数を掛けることにより状態密度が、さらに別温度での Boltzmann weight を掛けなおすことにより、別温度でのエネルギーヒストグラムが原理的には得られる。つまり、逆温度  $\beta$  で得られたエネルギー分布  $P(E, \beta)$  から、別の温度  $\beta'$  でのエネルギー分布が

$$P(E, \beta') \propto P(E, \beta) e^{(\beta - \beta')E}$$

によって求められる。importance sampling の精神をないがしろにしたとも言えるこの方法が histogram reweighting である。大昔から何度となく再発見されているが、Ferrenberg & Swendsen の提案 [9] により、一躍広まった。この方法の問題点等については、文献 [1] を参照されたい。

繰り返すことにより、順次  $f(E)$  の値を改良してゆくという方法を提案した。いわば、シミュレーションの過程で平衡分布自体を適応的に学習させようというわけである。

実際にこれを行なう際には、エネルギーを  $[E_0, E_1], [E_1, E_2], \dots, [E_{m-1}, E_m]$  のように区間に分け、区間  $E_i \leq E \leq E_{i+1}$  に対して

$$f(E) = \alpha_i + \beta_i E$$

のように  $f(E)$  を折れ線近似することが多い。この形式を使うと、エネルギー区間ごとに違う温度でシミュレーションをしているという気分になれる。

マルチカノニカル・アンサンブルでは、さまざまなエネルギー値がなるべく均等に出現するようにエネルギーをコントロールする。したがって、自由エネルギー障壁に起因するヒステリシスをもつ場合、要するに一次転移に対する処方として、まずは提案された。この場合、自由エネルギー障壁部分にあって普通のカノニカル分布では実現確率が極めて低くなってしまうような状態でも、無理やり実現確率を引き上げてやることになり、障壁を越えた状態遷移が頻繁に起きるようになる。なお、Field driven の一次転移に対しては、温度とエネルギーではなく磁場と磁化を考えたマルチカノニカル法が行なわれており、Berg らは *multimagnetical* [11] と称している。

#### 4.2 交換モンテカルロ法

一方、違う温度をたくさん用意するという意味で一見似ているのが交換 MC 法 [12] である<sup>7</sup>。マルチカノニカル法がひとつの系をいろいろな温度で計算するのに対し、こちらは全く同じ系を複数用意し、それらを違う温度で並列にシミュレーションする。むしろ、ただたくさんの系を並べるだけではなんの御利益もないが、時折システムを入れ替える (あるいは温度の方を入れ替えると思ってよい) ことによって、違う温度の状態を混ぜ、緩和を速くしようというのである。

<sup>7</sup> 統計物理の分野では福島・根本によって提案されたが、統計学などの分野でも独立に発見されており、さまざまな名前で呼ばれている [13]

系が二つの場合を例にとろう。それぞれの温度を  $\beta_1, \beta_2$  とすれば、ふたつの系の同時平衡分布は

$$P(E_1, E_2; \beta_1, \beta_2) \propto e^{-\beta_1 E_1 - \beta_2 E_2}$$

である。ここで、このふたつを入れ替える遷移を導入する。その際、遷移確率に対して

$$\frac{w(1, 2 \rightarrow 2, 1)}{w(2, 1 \rightarrow 1, 2)} = e^{(\beta_1 - \beta_2)(E_1 - E_2)}$$

を要求すれば、同時平衡分布は不変に保たれる。系の温度は、マルチカノニカルと同様に preliminary run で最適な値を学習させればよい。マルチカノニカルと違い、個々の系のシミュレーションは普通のMCだから、過去のプログラム資産がそのまま生かせるとか、ベクトル計算用に書いたコードがそのまま使えるなど、実用上の敷居が低い方法である。

この交換法とマルチカノニカルとの最大の違いは、後者がエネルギーを制御するのに対して、こちらは温度を制御するところにある<sup>8</sup>。これは一見ささいな違いのようだが、一次転移の場合には本質的に効いてくる。当然、ヒステリシスを避けるには温度を制御したのではだめで、マルチカノニカルのほうがより本質をついていることになる。

なお、最近岡部によって、秩序形成のシミュレーションに交換法を適用することが試みられている[15]。ダイナミクス自体は“嘘”になってしまうが、ドメイン成長の指数などは影響をうけないところが味噌である。

### 4.3 rugged free-energy landscape

福島・根本の交換法はそもそもスピングラスの rugged free-energy landscape を攻める目的で提案された。また、Berg たちは同様にマルチカノニカル法をスピングラスに応用している[16]。この場合、拡張アンサンブルを使う意味あいは一次転移の場合とは少々変わってくる。一次転移の場合、

<sup>8</sup>講演ではとりあげなかったが、温度を制御する立場では、simulated tempering という方法が提案されている[14]。交換法はむしろこの tempering に似ており、実際、parallel tempering などと呼ぶ研究者もいる

エネルギー値の出現確率を均等にすることが、そのままヒステリシスの解消につながった。一方、rugged landscape の場合は、むしろ、エネルギー（あるいは温度）をマルチカノニカルや交換法で上下させて local minimum からの脱出を可能にしようというのがそのココロとなる。

むろん、なにも考えないMCよりはるかによい。しかし、温度を上げ下げするだけでは、あまりにもあなたまかせなのではないか、という疑問も生じないわけではない。rugged landscape なら、エネルギーを均等にするのではなく、ruggedness を解消するのが正しいのではないだろうか。つい最近、Berg & Janke は replica overlap  $Q$  を平らにするアンサンブル[17]を提案している。つまり、交換法のように二つのレプリカを同時にシミュレーションし、 $Q$  に共役な仮想温度をマルチカノニカルと同様に設定しようというものだ。<sup>9</sup>  
<sup>10</sup>これは、ランダム系の本質をついているのではないだろうか。少なくとも、考え方は正しそうだ。ただし、実用上は、このままではあまり有効でない。温度方向にも動かすなど、もうひと工夫必要だろう。

### 4.4 基本方針といくつかの応用

結局、目的に応じてアンサンブルそのものを工夫すればいいわけだ。それが非現実的なアンサンブルだったり、物理的にはありえないような状態を含むものであっても、どうせ最終的には histogram reweighting でカノニカルに変換してしまうのだから、かまわない。というよりも、むしろ積極的に非物理的領域へアンサンブルを拡張してしまうのが、これからのMCの方向性と言えそうだ。もちろん、なんでもやればいいというものではないので、それによってうまく困難が解消できるよう

<sup>9</sup>実はこの方法は、Berg などよりはるか以前に伊庭氏から聞いたことがある。残念ながら、論文の形では残されていない(と思う)

<sup>10</sup>レプリカを使うスピングラスのシミュレーションとしては、Swendsen & Wang によって提案された方法がある[18]。これは Swendsen-Wang 流のクラスター MC の精神をスピングラスに拡張しようとしたものだが、交換法とも通じる部分がある

なものを考えなくてはならない<sup>11</sup>。

たとえば、エントロピーを計算したければどうすればいいだろうか。普通のモンテカルロ法なら、さまざまな温度で独立したシミュレーションを行なって、温度について数値積分をすることになるだろう。ところが、マルチカノニカル法なら、はじめから全温度領域でのエネルギーヒストグラムが得られているのだから、一回のシミュレーションで任意の温度でのエントロピーが計算できてしまう。とすれば、温度以外の変数で積分を実行して得られるような物理量についても、マルチカノニカル法の応用で計算できそうだ。

最近の例を挙げよう。Wilding & Müller は、高分子濃厚溶液系 (ただし、格子モデル) での化学ポテンシャルを計算する手法を提案している [19]<sup>12</sup>。やりたいことは、 $N$  分子系と  $N+1$  分子系での自由エネルギー差の計算である。単純にやろうと思えば、 $N$  分子系の熱平衡状態にもう一個の高分子をとにかくつつこんでみればいいわけだが、相手が高分子の場合にはなかなかそうはいかない。モノマー同士が重ならないことを要求すると、余分の高分子がおさまるだけの隙間があいてなくてはならないからだ。そこで、隙間が足りなくてもとにかく余分の高分子をいれてしまうことにしよう。そのために、余分の高分子はそれ以外の高分子から見ると少々透けて見えるものだと思うことにする。その透け具合をマルチカノニカル法によって制御する。

制御は余分の高分子とそれ以外の高分子との相互作用の強さを可変として、それに共役な仮想温度を導入することにより達成できる。つまり、 $N$  高分子系と余分の一分子とが完全に独立な場合から、すべての高分子が同等で  $N+1$  高分子系とみなせる場合までをマルチカノニカル的につなぐわけだ。もちろん、途中の中途半端な状態に物理的な意味はないが、これによって、 $N$  分子系と  $N+1$  分子系が滑らかにつながり、化学ポテンシャルが計算できる。ここでマルチカノニカル法によって積極的に制御するところが重要である。単に透け

具合に関する仮想温度を一定に保ただけでは  $N$  分子系から  $N+1$  分子系までの状態が十分な頻度で出現しないし、仮想温度で制御するのでなければ熱力学的積分が実行できない。同じ思想で、Bruce たちは格子形の違う 2 種の結晶の間を行き来するシミュレーションを提案している [20]。これで、格子形の違いによる自由エネルギー差が計算できる。

緩和を速くするために非物理的な状態を使うことも考えられる。手前味噌になるが<sup>13</sup> random heteropolymer のシミュレーションを例にとろう。この問題は、rugged free-energy landscape である上に self-avoiding condition による制約のために遷移の道筋までが限られているという二重苦を抱えている。スピングラスなどと同じ思想で rugged free-energy landscape を克服するためにマルチカノニカル法が使われたりしているが [21]、長いポリマーになるとマルチカノニカル法ではなかなか難しい。self-avoiding condition はエネルギーと関係ないので、温度を上げ下げしてもこれによる制約は緩和できないからだ。要するに、純粋な self-avoiding walk ですら、シミュレーションは難しいのである [22]。しかし、問題点が self-avoiding condition だとわかっているのだから、そこを積極的に攻めればなんとかなりそうだ。

最近、我々 (伊庭・千見寺・菊池) は、self-overlap を許す walk と self-avoiding walk との間を行き来することによって random heteropolymer のシミュレーションを行なう方法を提案している [23]。この方法ではモノマー同士の重なりを禁止してしまうのではなく、重なり数に応じて増える仮想エネルギーを定義して、それに共役な仮想温度を導入し、マルチカノニカル法によって制御する。それによって、self-avoiding な状態同士を重なりのある状態を経由して結びつける新たな道を状態空間中に引こうというわけだ。ただし、これだけではうまくいかない。やはり、温度についてもマルチカノニカル法で制御することが必要になる。最終的に self-avoiding condition を満たす状態だけ

<sup>11</sup> 標語的に言うなら、“押してみても痛いツボを探す”

<sup>12</sup> この仕事については、研究会終了後に知った

<sup>13</sup> 自分たちの話がここまで全然出てこなかったんだから、ひとつくらいいいでしょう



を残せば、histogram reweightingによって正しいカノニカル分布が得られる。重なりのある状態は捨ててしまうのだから、一見無駄が多そうだが、その無駄を補ってあまりあるほど緩和が速くなる。実際、普通のマルチカノニカル法では計算できないような長い random heteropolymer の熱力学量も計算できている。

この調子でいくらでも考えていくことはできる。たとえば、topological defect の効果を調べれば、異なる境界条件の間をつないでしまうというのはどうだろうか。周期境界と自由境界をつないでしまえば、表面自由エネルギーも求められそう。

## 5 まとめと展望

というわけで、等価なモデルと拡張アンサンブルのふたつの観点から、最近のモンテカルロ法の動向を見てきた。single-spin flip 法に代表される conventional な方法が、“物理的にもっともらしいプロセスを使えば、物理系は自ずとその性質を見せてくれる”という精神で行なわれていた(たぶん)のに対して、目的さえ達成できるならその過程が非物理的であっても気にしない、というより、非物理的過程や非物理的状态を積極的に使おうというのが最近の傾向だと思う。Swendsen & Wang は、数学的な書き換えにすぎなかったはずのパーコレーション表示が、実はそのままシミュレーションの方法として使えることを発見した。拡張アンサンブルは、最終的に欲しいアンサンブルとシミュレーションを行なうアンサンブルが違っていても構わないという新しい発想に基づいている。

どちらにせよ、“途中経過の物理的意味”は失われていることを改めて注意しておきたい<sup>14</sup>。single-spin flip はダイナミクス自体それなりにもっともらしいし、イジングモデルなら Glauber Dynamics そのものである。それに対し、Swendsen

<sup>14</sup>この点は、研究会でも複数の方から質問をいただいたので、読者の中にも気になるかたが少なからずおられるかと思う

& Wang のダイナミクスが現実の磁性体なり合金なりのダイナミクスに似ているとはあまり思われない。まして、マルチカノニカルだとか非物理的状态を含む拡張アンサンブルだとかが現実のダイナミクスと関係あるとは誰も思わないだろう<sup>15</sup>。“熱力学量もダイナミクスも”と欲ばる必要はないし、欲ばってはいけない。

もうひとつ、マルチカノニカル法などによる積極的な制御についても強調しておきたい。いつかは起こるはずの準安定状態からの遷移をただ待ち続けるのが従来の方法だったとすると、起こりにくい遷移を無理にでも起こしてやろうというのがマルチカノニカル法のココロだと言っていいだろう。

統計力学の展望という観点からは、拡張アンサンブルの考え方がカノニカル・アンサンブルの呪縛から我々を解放つのだ、と大ぶろしきを広げてみるのもいいかもしれない。カノニカル以外のアンサンブルを導入することは、必ずしもシミュレーションのための人為的操作とだけ捉えなくてはならないわけでもない。最近、Tsalis などがカノニカルではないアンサンブルの重要性を強調していたりするように、もう少し広い意味あいを拡張アンサンブルに見いだすこともできるかもしれない。

## 6 おわりに

実のところ、“統計物理学の展望”というテーマのもとでこのような内容の講演をすることには、自分の中で少々抵抗がなかったわけでもない。しかし、思った以上にこういう話に興味をもってくれるかたがおられたようで、まあよかったかなあという気がしている<sup>16</sup>。

<sup>15</sup>これも質問されたことだが、能勢の分子動力学の場合は少々微妙かもしれない。もちろん、長時間で考えれば“嘘”のダイナミクスに違いない。しかし、粒子の運動方程式を解いていることもまた確かなので、短時間のふるまいが必ずしも現実とかけはなれているというわけでもなさそう。少なくとも余分の自由度があまり大きく変化しない程度のタイムスケールでは、現実のダイナミクスに近いと思われる

<sup>16</sup>その一方で、松田博嗣先生から、このような計算方法の議論が基礎物理の発展に関係あるのか、という厳しいご質問

最後になるが、本講演の内容については、岡部豊、伊庭幸人、千見寺浄慈、宮田雄作、伊藤伸泰の各氏との長年にわたる議論にもとづいている。特に拡張アンサンブルについては、その重要性をいち早く指摘し、多くの試みを行なってこられた伊庭氏との議論による部分が大い。各氏に感謝する。

## 参考文献

- [1] モンテカルロ法の教科書として、絶対にお薦めできるというほどにものすごくよいものがあるわけではない。標準的なものとしては、たとえば
- K. Binder and D. W. Heermann: “*Monte Carlo Simulation in Statistical Physics — An Introduction, 2nd. edition*”, (Springer, 1992)
- など。
- 宮下精二: “熱・統計力学”, (培風館, 1993)
- にもコンパクトな解説がある。また、
- 伊庭幸人: “統計学者・数理工学者のための統計物理入門 - 改訂版 (3.02 版) - 格子スピン模型とマルコフ連鎖モンテカルロ法を中心にして -”, ISM Research Memorandum No.635, February, 1997
- はモンテカルロ法の原理から拡張アンサンブルまでを扱っている。同じ著者の
- 伊庭幸人: “モンテカルロ法の新しい傾向とその背景 - HOW TO WALK ON RUGGED LANDSCAPES -”, 日本物理学会 1995 年春の年会 シンポジウム予稿
- も本講演の内容と共通の話題を扱っている。いずれも <http://www.ism.ac.jp/~iba/jdoc.html> より入手可能。
- 菊池 誠: “モンテカルロで行こう! またはダイスをころがせ”, 物性研究をいただいたこともつけくわえておいたほうがいいだろう。
- 1994/11 (<http://glimmung.phys.sci.osaka-u.ac.jp/kikuchi/physics.html> より入手可能)
- も参照
- [2] 岡部・菊池: 固体物理 **21** (1986) 725  
N. Ito and Y. Kanada: Supercomputer **V** (1988) 31.  
など
- [3] R.H. Swendsen and J.-S. Wang: Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 86.
- [4] P.W. Kasteleyn and C.M. Fortuin: J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26** (1969) 11.
- [5] N. Ito and G.A. Kohring: Intern'l J. Mod. Phys. **C5** (1990) 1.
- [6] V. Cataudella *et al.*: Phys. Rev. **E54** (1996) 175.
- [7] U. Wolff: Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 361; Nucl. Phys. **B322** (1989) 759.
- [8] J. Machta *et al.*: Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 2792; Phys. Rev. **E54** (1996) 1332.
- [9] A.M. Ferrenberg and R.H. Swendsen: Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635; Phys. Rev. Lett. **63** (1988) 1195.
- なお、Histogram reweighting の歴史については
- R.H. Swendsen *et al.*: in *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics* ed. K. Binder (Springer, 1992)
- に詳しい。これにはまたクラスター MC のコンパクトな解説もあるので一読の価値あり。
- [10] B. Berg, and T. Neuhaus: Phys. Lett. **B267** (1991) 249; B.A. Berg and T. Celik: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2292.
- [11] B. Berg *et al.*: Phys. Rev. **B47** (1993) 497; Z. Phys. **B90** (1993) 229.

- [12] K.Hukushima and Y.Nemoto: J. Phys. Soc. Jpn. **65**(1996) 1604.
- [13] C.J.Geyer: in *Computing Science and Statistics*, Ed. E.M.Keramides, (Interface Foundation, Fairfax Station, Va.,1991) 156; K. Kimura and K. Taki: IEICE Technical Report NC-90-1 (1990) 1.  
 など。詳しくは [1] 中の伊庭氏の文献を参照のこと。
- [14] E.Marinari, and G.Parisi Europhys. Lett. **19**, 451 (1992).
- [15] 私信
- [16] B.A. Berg: in *Computer Simulations in Condensed Matter Physics VII* ed. D.P. Landau, K.K. Mon and H.B. Schüttler (Springer, 1994).
- [17] B.A. Berg and W. Janke: cond-mat/9712320
- [18] R.H. Swendsen and J.-S. Wang: Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 2607; J.-S. Wang and R.H. Swendsen: Phys. Rev. **B38** (1988) 4840; 同 9086.
- [19] B. Wilding and M. Müller: J. Chem. Phys. **101** (1994) 4324.
- [20] A.D. Bruce, N.B. Wilding and G.J. Ackland: Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 3002.
- [21] N. Urakami and M. Takasu: J.Phys.Soc.Jpn **65** (1996) 2694; Molecular Simulation **19** (1997) 63.
- [22] A. D.Sokal: in *Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulation in Polymer Science*, ed. K. Binder (Oxford University Press, 1995) p.47.
- [23] Y. Iba, G. Chikenji and M. kikuchi: to be published in J. Phys. Soc. Jpn. (cond-mat/9807237)